

ФАЗОВЫЕ ПЕРЕХОДЫ И КРИТИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА В АНТИФЕРРОМАГНИТНОЙ МОДЕЛИ ИЗИНГА НА СЛОИСТОЙ ТРЕУГОЛЬНОЙ РЕШЕТКЕ С УЧЕТОМ ВНУТРИСЛОЙНЫХ ВЗАИМОДЕЙСТВИЙ ВТОРЫХ БЛИЖАЙШИХ СОСЕДЕЙ

М. К. Бадиев^{a}, А. К. Муртазаев^{a,b}, М. К. Рамазанов^a*

^a *Институт физики Дагестанского научного центра Российской академии наук
367003, Махачкала, Россия*

^b *Дагестанский государственный университет
367025, Махачкала, Россия*

Поступила в редакцию 1 марта 2016 г.

На основе репличного алгоритма с помощью метода Монте-Карло выполнены исследования фазовых переходов и критических свойств антиферромагнитной модели Изинга на слоистой треугольной решетке с учетом внутрислойных взаимодействий вторых ближайших соседей. На основе гистограммного метода и метода кумулянтов Биндера проведен анализ характера фазовых переходов. Установлено, что в исследуемой модели переход из неупорядоченной фазы в парамагнитную реализуется как фазовый переход второго рода. С использованием теории конечномерного скейлинга рассчитаны статические критические индексы теплоемкости α , восприимчивости γ , параметра порядка β , радиуса корреляции ν , а также индекс Фишера η . Показано, что антиферромагнитная модель Изинга на слоистой треугольной решетке относится к XY-классу универсальности критического поведения. Учет внутрислойных взаимодействий вторых ближайших соседей в этой модели приводит к смене класса универсальности критического поведения.

DOI: 10.7868/S0044451016100096

1. ВВЕДЕНИЕ

Исследование фазовых переходов (ФП) и критических свойств соединений, имеющих треугольную решетку, является актуальной задачей в физике конденсированного состояния. Такие соединения привлекают большое внимание исследователей из-за интересных для науки свойств [1–7]. Спиновые системы, имеющие треугольную решетку, вследствие особой геометрии сильно фрустрированы. С понижением температуры процесс упорядочения в таких системах происходит гораздо медленнее по сравнению даже с обычными фрустрированными системами. Данное обстоятельство обусловлено тем, что в системах с меньшим координационным числом возможны не только состояния с нетривиальным глобальным вырождением, но и локально вырожденные состояния [8, 9].

Двумерная антиферромагнитная модель Изинга на треугольной решетке является относительно простой геометрически фрустрированной моделью, которая интенсивно исследуется несколько десятков лет [10–14]. В этой модели, где взаимодействие ограничено ближайшими соседями, спиновое упорядочение сильно подавлено из-за эффектов фрустраций. В результате в данной системе ФП отсутствует при любой конечной температуре [10–14]. Однако учет взаимодействий следующих ближайших соседей стабилизирует спиновое состояние, и система проявляет ФП подобно ферромагнитной XY-модели с полем, нарушающим шестикратную симметрию [15].

В трехмерных изинговских антиферромагнетиках CsCoCl₃ и CsCoVr₃ аномалии физических величин наблюдаются в двух температурных точках [16, 17]. Вычисления, проведенные для них в рамках приближения среднего поля [18], а также кластерным вариационным методом [19], показывают, что в промежуточном состоянии одна из трех маг-

* E-mail: m_zagir@mail.ru

нитных подрешеток не упорядочена. Вместе с тем, результаты метода Монте-Карло (МК) показывают, что такие частично неупорядоченные состояния описываются модой со случайно изменяющейся в пространстве и во времени фазой [20, 21]. Данными результатами можно объяснить наблюдаемые заметные флуктуации во времени магнитной структуры [16].

Вместе с тем фазовые переходы и критические свойства в антиферромагнитной модели Изинга на слоистой треугольной решетке с учетом взаимодействий вторых ближайших соседей внутри слоев практически не исследованы. Учет взаимодействий следующих ближайших соседей в классической трехмерной модели Изинга сопровождается вырождением основного состояния и появлением различных фаз и ФП, а также может влиять на критическое поведение модели, в частности, появляются различные аномалии критических свойств [22].

Численное моделирование методом МК для модели Изинга на слоистой треугольной решетке с учетом взаимодействий следующих ближайших соседей было проведено в работе [23]. В этой работе авторы показали, что в интервале значений величины взаимодействия вторых ближайших соседей от нуля до 0.25 имеет место ФП второго рода. Рассчитаны значения критических индексов, которые свидетельствуют о том, что в рассмотренном интервале наблюдается универсальное критическое поведение подобное XY-классу универсальности.

Однако, на сегодняшний день остаются спорными множество вопросов, связанных с фазовыми переходами и критическими свойствами этой модели. В связи с этим в данной работе мы предприняли попытку исследовать фазовые переходы и критические свойства антиферромагнитной модели Изинга на слоистой треугольной решетке с учетом взаимодействий вторых ближайших соседей внутри слоев.

Интерес к исследуемой модели обусловлен тем, что при учете антиферромагнитных взаимодействий ближайших соседей внутри слоев данная модель становится фрустрированной. Многие физические свойства фрустрированных систем сильно зависят от величины взаимодействия вторых ближайших соседей. Антиферромагнитная модель Изинга на слоистой решетке с учетом взаимодействия вторых ближайших соседей до сих пор является малоизученной. Поэтому исследование этой модели на основе современных методов и идей позволит получить ответ на ряд вопросов, связанных с критическим поведением, с характером и природой ФП слоистых фрустрированных спиновых систем.

2. МОДЕЛЬ И МЕТОД ИССЛЕДОВАНИЯ

Антиферромагнитная модель Изинга на слоистой треугольной решетке с учетом взаимодействий вторых ближайших соседей описывается гамильтонианом [24]

$$H = -J_1 \sum_{\langle i,j \rangle} (S_i S_j) - J_2 \sum_{\langle i,l \rangle} (S_i S_l), \quad (1)$$

где $S_i = \pm 1$ — изинговский спин, $J_1 < 0$ и $J_2 > 0$ — константы обменного взаимодействия. Решетка состоит из двумерных треугольных слоев, сложенных по ортогональной оси. Первый член в формуле (1) характеризует антиферромагнитное взаимодействие всех ближайших соседей, которое берется одинаковым как внутри слоев, так и между слоями. Второй член характеризует ферромагнитное взаимодействие следующих за ближайшими соседями, находящихся в том же слое; $k = J_2/J_1$ — величина взаимодействия вторых ближайших соседей. В данной работе рассматриваются два случая, когда $k = 0$ и $k = 1.0$.

Исследования критических свойств фрустрированных спиновых систем традиционными теоретическими, экспериментальными и численными методами сталкиваются с рядом труднопреодолимых проблем. Это связано с тем, что для таких систем характерна проблема многочисленных долин локальных минимумов энергии. Строго и последовательно на основе микроскопических гамильтонианов такие системы могут быть изучены методами МК [25–30]. Методы МК позволяют исследовать термодинамические свойства спиновых систем практически любой сложности. Наиболее мощными и эффективными в исследовании фазовых переходов и критических свойств в фрустрированных системах оказались репличные алгоритмы метода МК [31–33]. Поэтому в данном исследовании был использован высокоэффективный репличный обменный алгоритм метода МК, который более подробно описан нами в работе [33].

3. РЕЗУЛЬТАТЫ МОДЕЛИРОВАНИЯ

Расчеты проводились для систем с периодическими граничными условиями и с линейными размерами $L \times L \times L = N$, $L = 30-90$. Для вывода системы в состояние термодинамического равновесия отсекался участок длиной $\tau_0 = 4 \cdot 10^5$ МК-шагов/спин, что в несколько раз больше длины неравновесного участка. Усреднение термодинамических величин

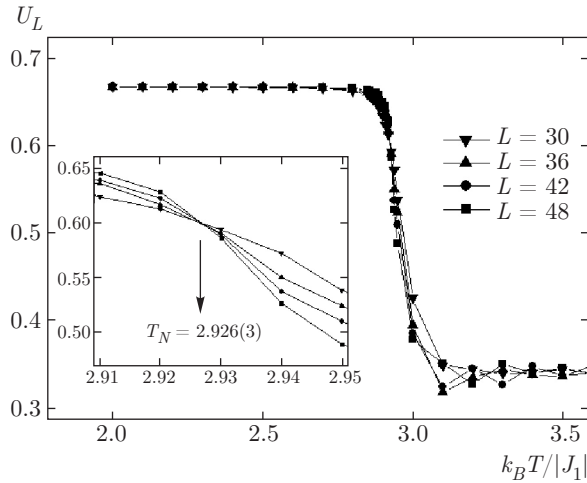


Рис. 1. Зависимость кумулянта Биндера U_L от температуры $k_B T / |J_1|$ для $k = 0$

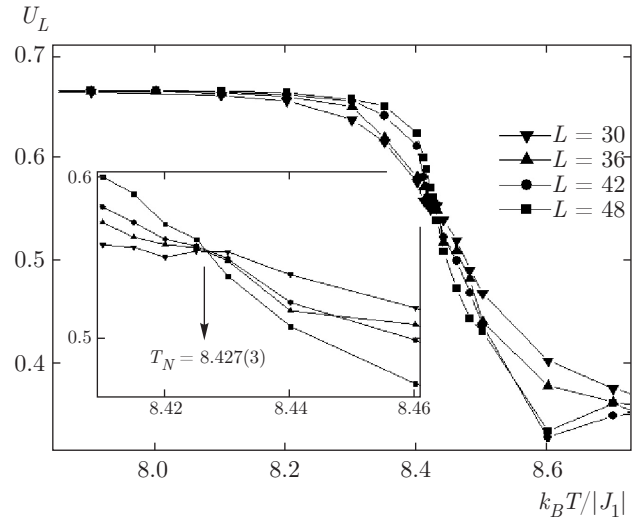


Рис. 2. Зависимость кумулянта Биндера U_L от температуры $k_B T / |J_1|$ для $k = 1.0$

проводилось вдоль марковской цепи длиной $\tau = 500\tau_0$ МК-шагов/спин.

Параметр порядка системы m вычислялся с помощью выражения [34]

$$m = \frac{3}{N} \sqrt{\frac{\langle M_A^2 + M_B^2 + M_C^2 \rangle}{3}}, \quad (2)$$

где M_A, M_B, M_C — намагниченности трех подрешеток.

Намагниченность подрешетки определялась по формуле [34]

$$\langle |M_r| \rangle = \left\langle \sqrt{S_x^2 + S_y^2 + S_z^2} \right\rangle, \quad r = A, B, C. \quad (3)$$

Для определения критической температуры T_N мы использовали метод кумулянтов Биндера U_L четвертого порядка, который имеет вид [35]

$$U_L = 1 - \langle m^4 \rangle_L / 3 \langle m^2 \rangle_L^2. \quad (4)$$

Согласно теории конечноразмерного скейлинга (КРС), точка пересечения всех кривых $U_L(T)$ является критической точкой. Выражение (4) позволяет определить критическую температуру T_N с большой точностью. Следует отметить, что применение метода кумулянтов Биндера позволяет также хорошо тестировать тип ФП в системе. В случае ФП второго рода кривые температурной зависимости кумулянтов Биндера U_L имеют четко выраженную точку пересечения [35].

На рис. 1 и 2 представлены характерные зависимости U_L от температуры для разных значений

L для $k = 0$ и $k = 1.0$ (здесь и на всех последующих рисунках статистическая погрешность не превышает размеров символов, использованных для построения зависимостей). Эти рисунки демонстрируют точность определения критической температуры. На графиках видно, что в критической области наблюдаются четко выраженные точки пересечения ($T_N = 2.926(3)$ для $k = 0$ и $T_N = 8.427(3)$ для $k = 1.0$ (здесь и далее температура дана в единицах $|J|/k_B$)), что свидетельствует о ФП второго рода.

Для более подробного анализа рода ФП мы использовали гистограммный анализ данных метода МК [32, 36]. Этот метод позволяет надежно определить род ФП. Методика определения рода ФП этим методом подробно описана в работе [37].

Результаты нашей работы показывают, что переход из неупорядоченной фазы в парамагнитную для $k = 0$ и $k = 1.0$ является переходом второго рода. Это продемонстрировано на рис. 3 и 4. На этих рисунках представлены гистограммы распределения энергии для систем с линейными размерами $L = 90$. Графики построены вблизи критической температуры. На рис. 3 и 4 видно, что в зависимости вероятности P от энергии U для систем с линейными размерами $L = 90$ наблюдается по одному хорошо выраженному максимуму как для случая $k = 0$, так и для $k = 1.0$. Наличие одного максимума на гистограмме распределения энергии свидетельствует в пользу ФП второго рода.

Для расчета статических критических индексов теплоемкости α , восприимчивости γ , параметра порядка β , радиуса корреляции ν и индекса Фишера η применялись соотношения теории КРС [38].

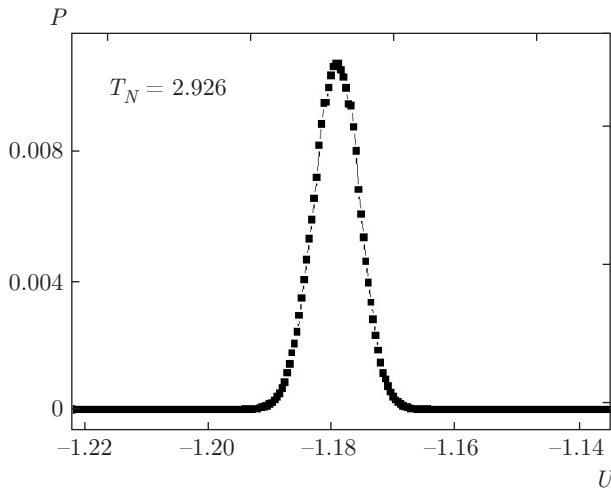


Рис. 3. Гистограмма распределения энергии для $L = 90$ при $k = 0$

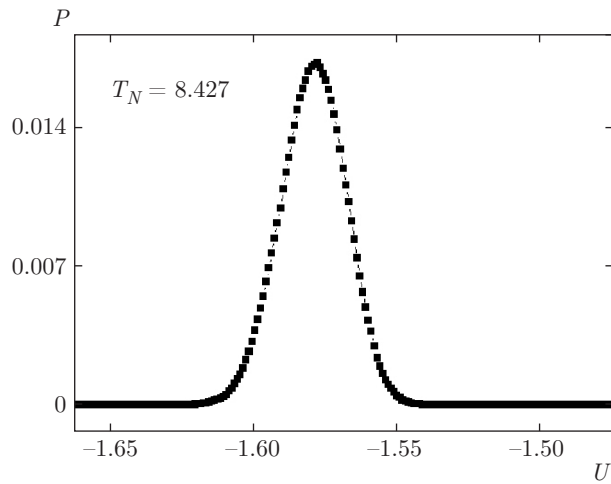


Рис. 4. Гистограмма распределения энергии для $L = 90$ при $k = 1.0$

Из теории КРС следует, что в системе с размерами $L \times L \times L$ при $T = T_N$ и достаточно больших L выполняются следующие выражения [38]:

$$m \sim L^{-\beta/\nu}, \tag{5}$$

$$\chi \sim L^{\gamma/\nu}, \tag{6}$$

$$V_n \sim L^{1/\nu} gV_n, \tag{7}$$

где gV_n — некоторая постоянная, а в качестве V_n могут выступать

$$V_n = \frac{\langle m^n E \rangle}{\langle m^n \rangle} - \langle E \rangle, \quad n = 1, 2, 3, 4. \tag{8}$$

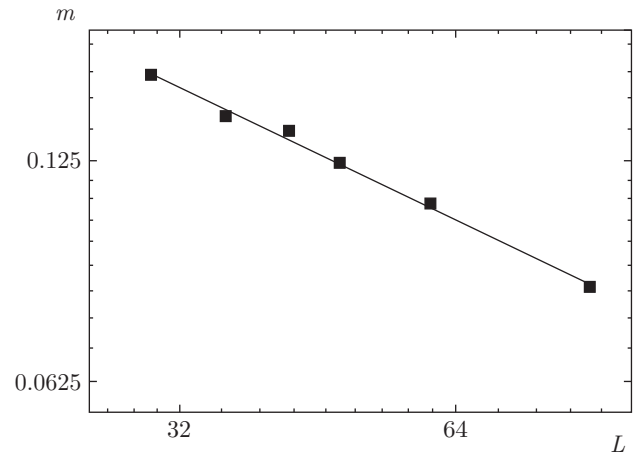


Рис. 5. Зависимость параметра порядка m от линейных размеров системы L при $T = T_N$ для $k = 1.0$

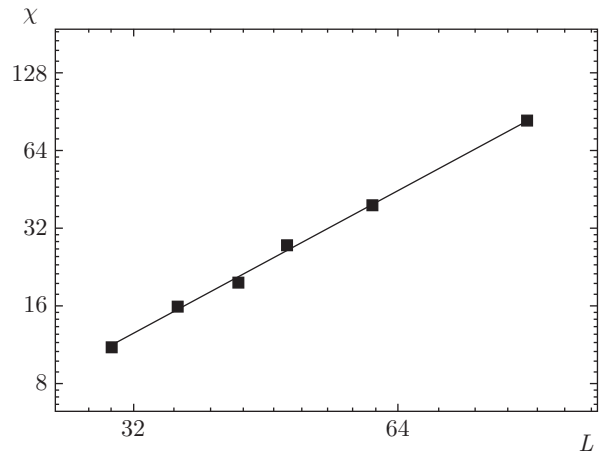


Рис. 6. Зависимость восприимчивости χ от линейных размеров системы L при $T = T_N$ для $k = 1.0$

Эти выражения были нами использованы для определения β , γ и ν .

Более подробно процедура определения критического индекса теплоемкости α и индекса Фипера η приведена нами в работах [33, 39].

На рис. 5 и 6 в двойном логарифмическом масштабе представлены характерные зависимости магнитного параметра порядка m и восприимчивости χ от линейных размеров решетки L для случая $k = 1.0$. Все точки на графиках в пределах погрешности ложатся на прямые. Углы наклона этих прямых определяют значения β/ν и γ/ν .

На рис. 7 в двойном логарифмическом масштабе представлены характерные зависимости параметров V_i при $i = 1, 2, 3$ от линейных размеров решетки L для случая $k = 1.0$. Как видно на рисунке, все

Таблица. Значения критических индексов α , β , γ , ν и η

Критический параметр	Данные этой работы		[40]	[41]	[42]	[43]
	$k = 0$	$k = 1.0$				
α	-0.040(3)	0.142(10)	-0.01(2)	-0.05(3)	0.012(30)	-0.012
β	0.346(4)	0.371(4)	0.345(12)	0.311(4)	0.341(4)	0.348
γ	1.313(5)	1.166(5)	1.316(9)	1.43(3)	1.31(3)	1.315
ν	0.668(5)	0.651(5)	0.669(7)	0.685(3)	0.662(9)	0.671
η	0.033(10)	0.205(10)	—	—	—	—
T_N	2.926(3)	8.427(3)	—	—	—	—
$\alpha + 2\beta + \gamma = 2$	1.96	2.05	—	—	—	—

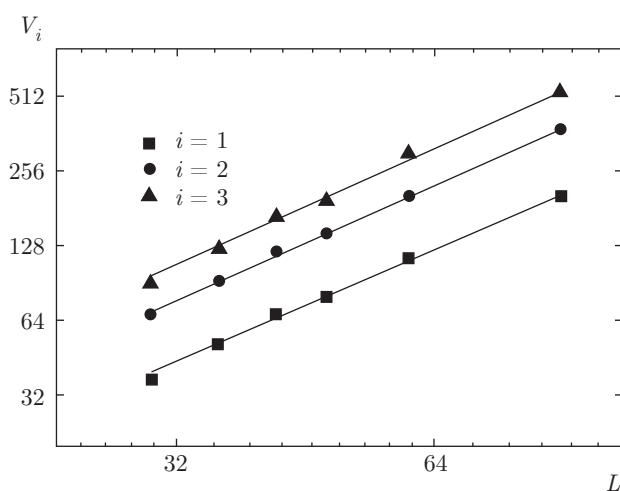


Рис. 7. Зависимость параметра V_i от линейных размеров системы L при $T = T_N$ для $k = 1.0$

точки на графиках в пределах погрешности хорошо ложатся на прямую. Зависимости на рисунке, проведенные в соответствии с методом наименьших квадратов, параллельны друг другу. Угол наклона прямой определяет значение $1/\nu$. Вычисленное таким образом значение ν использовалось для определения критических индексов теплоемкости α , восприимчивости γ и параметра порядка β . Аналогичным образом были рассчитаны критические индексы и для случая $k = 0$.

Все значения статических критических индексов, полученные таким образом, представлены в таблице.

Как видно в таблице, все значения критических индексов, рассчитанные нами для значения $k = 0$, в пределах погрешности совпадают со значениями критических индексов трехмерной XY-модели

[40], что свидетельствует о принадлежности данной модели к XY-классу универсальности критического поведения. Аналогичный результат был получен для данной модели в работах [41–43]. Значения критических индексов, рассчитанные нами при $k = 0$, хорошо согласуются с данными других авторов [41–43]. Что касается результатов, полученных нами для $k = 1.0$, то они сильно отличаются от данных, полученных для этой модели при $k = 0$. Можно предположить, что учет взаимодействий вторых ближайших соседей для трехмерной модели Изинга на слоистой треугольной решетке приводит к смене класса универсальности критического поведения.

4. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Исследование фазовых переходов и критических свойств трехмерной антиферромагнитной модели Изинга на слоистой треугольной решетке с учетом внутрислойного взаимодействия вторых ближайших соседей выполнено с использованием высокоэффективного репличного алгоритма метода Монте-Карло. На основе гистограммного метода анализа данных и метода кумулянтов Биндера четвертого порядка проведен анализ характера фазовых переходов. Показано, что в исследуемой модели реализуется фазовый переход второго рода. Рассчитаны все основные статические критические индексы. Расчет критических индексов выполнен на основе соотношений теории конечноразмерного скейлинга. Показано, что учет взаимодействия вторых ближайших соседей внутри слоев приводит к смене класса универсальности критического поведения данной модели.

Исследование выполнено при финансовой поддержке РФФИ (гранты №№ 16-02-00214-а, 16-32-00105 мол-а).

ЛИТЕРАТУРА

1. A. N. Berker, G. S. Grest, C. M. Soukoulis, D. Blankschtein, and M. Ma, *J. Appl. Phys.* **55**, 2416 (1984).
2. D. Blankschtein, M. Ma, A. N. Berker, G. S. Grest, and C. M. Soukoulis, *Phys. Rev. B* **29**, 5250 (1984).
3. S. N. Coppersmith, *Phys. Rev. B* **32**, 1584 (1985).
4. O. Heinonen and R. G. Petschek, *Phys. Rev. B* **40**, 9052 (1989).
5. J.-J. Kim, Y. Yamada, and O. Nagai, *Phys. Rev. B* **41**, 4760 (1990).
6. R. R. Netz and A. N. Berker, *Phys. Rev. Lett.* **66**, 377 (1991).
7. F. A. Kassan-Ogly, B. N. Filippov, A. K. Murtazaev, M. K. Ramazanov, and M. K. Badiiev, *J. Mag. Mag. Mater.* **324**, 3418 (2012).
8. P. Chandra, P. Coleman, and I. Ritchey, *J. de Phys.* **33**, 591 (1993).
9. J. T. Chalker, P. C. W. Holdsworth, and E. F. Shender, *Phys. Rev. Lett.* **68**, 855 (1992).
10. G. H. Wannier, *Phys. Rev.* **79**, 357 (1950).
11. G. F. Newell, *Phys. Rev.* **79**, 876 (1950).
12. R. M. F. Houtapel, *Physica* **16**, 425 (1950).
13. G. H. Wannier, *Phys. Rev. B* **7**, 5017 (1973).
14. E. Muller-Hartmann and J. Zittartz, *Zs. Phys. Kl. B* **27**, 261 (1977).
15. J. Hose, K. Kadanoff, S. Kirkpatrick, and D. R. Nelson, *Zs. Phys. Kl. B* **16**, 1217 (1977).
16. H. Yoshizawa and K. Hirakawa, *J. Phys. Soc. Jpn.* **46**, 448 (1980).
17. V. B. Yelon, D. E. Cox, and M. Eibshutz, *Phys. Rev. B* **12**, 5007 (1975).
18. H. Shiba, *Progr. Teor. Phys.* **64**, 466 (1980).
19. M. Kaburagi, T. Tonegawa, and J. Kanamori, *J. Phys. Soc. Jpn.* **51**, 3857 (1982).
20. P. Matsubara and S. Ikeda, *Phys. Rev. B* **28**, 4064 (1983).
21. P. Matsubara and S. Inawashira, *J. Phys. Soc. Jpn.* **53**, 4373 (1984).
22. D. P. Landau and K. Binder, *Monte Carlo Simulations in Statistical Physics*, Cambridge University Press, Cambridge (2000).
23. H. T. Diep, M. L. Plumer, A. Mailhot, R. Ducharme, and A. Caille, *Phys. Rev. B* **47**, 14312 (1993).
24. M. Zukovic, L. Mizisin, and A. Bobak, *ACTA Phys. Polonica A* **126**, 40 (2014).
25. А. К. Муртазаев, М. К. Рамазанов, Ф. А. Кассан-Оглы, Д. Р. Курбанова, *ЖЭТФ* **147**, 127 (2015).
26. F. A. Kassan-Ogly, A. K. Murtazaev, A. K. Zhuravlev, M. K. Ramazanov, and A. I. Proshkin, *J. Mag. Mag. Mater.* **384**, 247 (2015).
27. А. К. Муртазаев, М. К. Рамазанов, *Письма в ЖЭТФ* **101**, 793 (2015).
28. А. К. Муртазаев, М. К. Рамазанов, М. К. Бадиев, *ЖЭТФ* **142**, 338 (2012).
29. А. К. Murtazaev, M. K. Ramazanov, and M. K. Badiiev, *Physica B: Condensed Matter* **476**, 1 (2015).
30. А. К. Муртазаев, М. К. Рамазанов, М. К. Бадиев, *ЖЭТФ* **144**, 1239 (2013).
31. A. Mitsutake, Y. Sugita, and Y. Okamoto, *Biopolymers (Peptide Science)* **60**, 96 (2001).
32. F. Wang and D. P. Landau, *Phys. Rev. Lett.* **86**, 2050 (2001).
33. А. К. Муртазаев, М. К. Рамазанов, М. К. Бадиев, *ЖЭТФ* **132**, 1152 (2007).
34. D. P. Landau, *Phys. Rev. B* **27**, 5604 (1983).
35. К. Биндер, Д. В. Хеерман, *Моделирование методом Монте-Карло в статистической физике*, Наука, Москва (1995).
36. F. Wang and D. P. Landau, *Phys. Rev. E* **64**, 056101 (2001).
37. М. К. Рамазанов, *Письма в ЖЭТФ* **94**, 335 (2011).
38. P. Peczak, A. M. Ferrenberg, and D. P. Landau, *Phys. Rev. B* **43**, 6087 (1991).
39. А. К. Муртазаев, М. К. Рамазанов, М. К. Бадиев, *ФНТ* **37**, 1258 (2011).
40. M. F. Collins, *Magnetic Critical Scattering*, Oxford University Press, Oxford (1989).
41. A. Bunker, B. D. Gaulin, and C. Kallin, *Phys. Rev. B* **48**, 15861 (1993); *Phys. Rev. B* **52**, 1415 (1995).
42. M. L. Plumer and A. Mailhot, *Phys. Rev. B* **52**, 1411 (1995).
43. J. C. Le Guillou and J. Zinn-Justin, *J. Phys. Lett.* **46**, 137 (1985).